

УДК 539.2+518.5

© Ю. С. Митрохин, В. Е. Шудегов

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ *AB INITIO* ПСЕВДОПОТЕНЦИАЛА ДЛЯ РАСЧЕТА ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ТВЕРДЫХ ТЕЛ¹

Введение

Метод псевдопотенциала (ПП) в настоящее время становится одним из основных расчетных методов в вычислительной физике и химии. Он обладает целым рядом достоинств как с математической так и с физической точек зрения. С точки зрения математики в методе ПП используется наиболее простой и универсальный набор базисных функций — плоские волны. Это позволяет применять его к любым атомным структурам, в том числе и к неупорядоченным системам. Хорошо разработанный математический аппарат позволяет надежно контролировать достигаемую в расчетах точность и создавать надежные и хорошо отлаженные комплексы программ. С физической точки зрения метод ПП исключает из расчета химически инертные внутренние оболочки атомов, что значительно уменьшает объем необходимых вычислений. Волновые функции валентных оболочек разлагаются по плоским волнам и ортогонализуются к остальным волновым функциям. Ранние варианты метода ПП использовали подгортные параметры, которые брались или из эксперимента или из других зонных расчетов. С появлением *ab initio* ПП, то есть первопринципного ПП (ППП), отпала необходимость в использовании подгортных параметров. Все параметры *ab initio* ПП берутся из его сравнения с полноэлектронными расчетами из первых принципов соответствующих атомов. Однако, некоторые проблемы все же остались. Основная проблема — это трансферабельность. Она состоит в том, что атом, описываемый не истинной, а псевдоволновой функцией, должен вести себя в различном химическом окружении с другими атомами так же как и реальный атом. Это свойство трудно достигнуть для атомов с незаполненными d- и f-оболочками. В связи с этим, построение хороших псевдопотенциалов в значительной мере зависит от опыта и интуиции исследователя и является, больше искусством, чем наукой. Тем не менее, *ab initio* ПП построены для большинства атомов периодической таблицы Менделеева, и многие известные пакеты на базе *ab initio* ПП имеют свои базы данных с проверенными ПП.

§ 1. Основные детали расчета

В данной работе *ab initio* ПП применялся для расчета равновесного значения постоянной решетки a , объемного модуля упругости B и упругих констант c_{11}, c_{12}, c_{44} для интерметаллического соединения Ni_3Al с легирующими добавками Nb и Co (6%). Для расчета модулей упругости кристаллов можно, в принципе, использовать любой зонный метод расчета электронной структуры твердого тела. Наиболее экономичным и быстрым методом является метод линейных маффин-тин орбиталей в приближении атомной сферы ТВ-LMTO-ASA. Однако, наличие ковалентных связей в данной системе сплавов и необходимость использовать маффин-тин сферы не позволяет получить правильные результаты в методе ТВ-LMTO-ASA, в то время как метод ППП позволяет получать правильные результаты с высокой точностью (3-5%), хотя и при значительно больших вычислительных затратах.

В расчете была использована сетка по $\mathbf{k} = (20 \cdot 20 \cdot 20)$ (4096 k-р в ЗБ) [1]. Очевидно, что такие параметры расчета требуют очень больших вычислительных ресурсов. Кроме того, при большой размерности матрицы гамильтониана задача нахождения его собственных значений становится численно неустойчивой и по эффективности проигрывает задаче многомерной оптимизации, которая непосредственно вытекает и вариационного принципа Рэлея–Ритца.

¹Работа выполнена совместно с Институтом физики металлов г. Екатеринбург УрО РАН и Институтом металлургии и материаловедения им. А. А. Байкова РАН по программе Президиума РАН «Синтез новых материалов с заранее заданными свойствами».

Таблица 1: Рассчитанные значения постоянной решетки a , объемный модуль упругости B и упругие константы c_{11}, c_{12}, c_{44} в сравнении с экспериментом и другими расчетами.

Ni_3Al	a Å	B GPa	c_{11} GPa	c_{12} GPa	c_{44} GPa
PWSCF	3.366	180.5	227.6	166.0	111.2
FP-LMTO [8]	3.480	234	278	212	186
эксп. [9]	3.357	179	233	148	125

Методы многомерной оптимизации хорошо развиты в настоящее время. Они стали основными методами после появления пионерской работы Car Parinello [7], в которой был предложен метод первопринципной молекулярно динамики.

Для вычисления равновесного значения постоянной решетки вычислялась зависимость полной энергии кристалла от объема. Полученные данные аппроксимировались кривой по методу наименьших квадратов. Минимум этой кривой соответствовал равновесному объему V_0 . Постоянная решетки a бала пропорциональна корню третьей степени из V_0 . Объемный модуль упругости находился по формуле $B = (1/V_0) \cdot (\partial^2 E / \partial V^2)$ при $V = V_0$. Упругие константы c_{11}, c_{12}, c_{44} пропорциональны вторым производным полной энергии E по деформациям ϵ при равновесном объеме.

§ 2. Результаты и обсуждения

Данный расчет был выполнен на параллельном кластере на базе компьютеров Opteron в лаборатории математического моделирования ИМЕТ им Байкова (г.Москва). Использовались пакеты ABINIT и PWSCF в операционной системе SuSE 10.0. Один вариант расчета занимал 10-15 дней, расход оперативной памяти доходил до 8Gb, объем внешней памяти на жестком диске составлял 20-30 Gb. Для сравнения такой же расчет был выполнен на аналогичном кластере на базе процессора Itanium в тех же самых условиях. Оказалось, что его производительность в 2.5 – 3 выше, но и стоимость тоже, примерно во столько же раз выше. В расчете использовались сепарабельные нормосохраняющие псевдопотенциалы полученные по схеме предложенной в работе [4] (NC PP) и ультрамягкие ПП Вандербиля [5, 6] (US PP). Последние обладают более высокой сходимостью, но меньшей трансферабельностью. В таблице 1 приведены полученные результаты в сравнении с другими расчетами и с экспериментальными данными [9].

Список литературы

1. H. J. Monkhorst, J. D. Pack // Phys. Rev. B. 1976. Т. 13. С. 5188 – 5192.
2. Xavier Gonze and ABINIT group: <http://www.abinit.org/>.
3. S. Baroni and PWSCF group: <http://www.pwscf.org/>.
4. N. Trouller, J. L. Martins // Phys. Rev. B. 1991. Т. 43. С. 1993 – 2006.
5. D. Vanderbilt // Phys. Rev. B. Т. 41. С. 7892 – 7905.
6. A. M. Rappe, K. M. Rabe, E. Kaxiras, J. D. Jannopolos // Phys. Rev. B. Т. 41. С. 1227 – 1232.
7. R. Car, M. Parinello // Phys. Rev. Lett. 1985. Т. 55. С. 2471 – 2475.
8. D. Iotova, N. Kioussis, S. P. Lim // Phys. Rev. B. 1996. Т. 54. С. 14413 – 14419.
9. Ю. С. Митрохин, В. П. Белаш, Н. Н. Степанова, А. Б. Ринкевич, И. Н. Климова, Ю. Н. Акшенцев // ФММ. 2005. Т. 99. № 3. С. 47 – 53.

Митрохин Юрий Степанович
Удмуртский государственный ун-т,
Россия, Ижевск
e-mail: mit@uni.udm.ru

Шудегов Виктор Ефграфович
Институт Металлургии ИМЕТ,
Россия, Москва
e-mail: VEShudegov@council.gov.ru